РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ, ФИЗИКИ
И ВЫСОКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И КВАНТОВЫХ НАНОСТРУКТУР

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Элбакян Лусине Самвеловны «Полимерные нанокомпозиты на основе полиметилметакрилата, полипропилена, поливинилового спирта и поливинилпирролидона, допированные углеродными нанотрубками: теоретические расчеты, получение и свойства», представленной на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 2.6.6 «Нанотехнологии и наноматериалы»

Диссертационная работа Л.С. Элбакян посвящена актуальной научно-технической проблеме разработки полимерных нанокомпозитов с управляемыми физико-механическими и электрофизическими свойствами путем введения углеродных нанотрубок. В качестве полимерных матриц автором рассматриваются полиметилметакрилат, полипропилен, поливиниловый спирт и поливинилпирролидон. Особенностью представленной работы является сочетание теоретического квантово-химического моделирования методом теории функционала плотности (DFT) с комплексными экспериментальными исследованиями полученных нанокомпозитов.

Актуальность исследования не вызывает сомнений. Создание функциональных полимерных материалов с прогнозируемым комплексом эксплуатационных характеристик является одной из важных задач современного материаловедения и нанотехнологий. Введение наноструктурированных наполнителей, в частности углеродных нанотрубок, позволяет существенно изменять механические, электрофизические и другие свойства полимерных систем при относительно малом содержании наполнителя. При этом принципиальное значение имеют вопросы взаимодействия нанонаполнителя с полимерной матрицей, его диспергирования, формирования структуры композита и установления взаимосвязи между технологическими параметрами получения материала и его макроскопическими характеристиками. Именно решению данного комплекса взаимосвязанных задач посвящена рассматриваемая работа.

Цель диссертационной работы сформулирована как создание теоретически обоснованной и экспериментально верифицированной методологии прогнозируемого управления структурой и комплексом функциональных свойств нанокомпозитов на основе полимерных матриц, допированных углеродными нанотрубками. Для достижения поставленной цели автором решен широкий круг задач, включающий построение моделей полимерных систем и углеродных нанотрубок в рамках DFT, исследование сорбционного взаимодействия компонентов, разработку способов получения нанокомпозитов, экспериментальное исследование их механических и электрофизических характеристик и обобщение полученных результатов в виде единой методологии.

К несомненным достоинствам работы следует отнести ее комплексный характер. Автор не ограничивается исключительно теоретическим моделированием или экспериментальным исследованием, а реализует взаимосвязанную последовательность «моделирование – синтез – исследование – оптимизация». Такой подход позволяет использовать результаты квантово-химических расчетов для интерпретации экспериментальных данных и, в свою очередь, экспериментальные результаты для оценки адекватности теоретических моделей.

ВХОД. № 3975-13
«09» 10 2016г.

МЕЖГОСУДАРСТВЕННАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

0051, Республика Армения, г. Ереван, ул. Овсепа Эмина 123 8130, +374 12 77-57-75 www.rau.am info@rau.am

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И КВАНТОВЫХ НАНОСТРУКТУР

Значительный объем исследований посвящен квантово-химическому анализу взаимодействия полимерных фрагментов с одно- и двуслойными углеродными нанотрубками различного диаметра и хиральности. В рамках DFT автором исследованы геометрические и энергетические характеристики комплексов «полимер–УНТ», энергии адсорбции, распределение электронной плотности и особенности электронно-энергетической структуры. В частности, для системы ПММА–УНТ проведен последовательный анализ взаимодействия как структурной единицы полимера, так и более протяженных фрагментов ПММА с различными типами углеродных нанотрубок, что позволило сформулировать представления о механизме образования стабильных композитных систем.

Существенный научный интерес представляет проведенное автором сопоставление теоретических результатов с экспериментальными исследованиями. В работе показано, что модифицирование исследованных полимеров малыми концентрациями углеродных нанотрубок в диапазоне 0,01–0,2 мас.% позволяет заметно изменять их физико-механические характеристики. Автором определены оптимальные концентрационные интервалы для различных полимерных матриц: 0,05 мас.% УНТ для ПММА и ПВС, 0,2 мас.% для ПП и 0,12 мас.% для ПВП.

Отдельно следует отметить исследование электронно-энергетических характеристик композитов. Согласно представленным в автореферате результатам, для модифицированного углеродными нанотрубками ПММА экспериментально получено значение ширины запрещенной зоны около 0,406 эВ, на основании чего автор рассматривает полученный композиционный материал как узкозонный полупроводниковый материал и обсуждает возможности его применения в функциональных электронных и сенсорных системах.

Практическая значимость работы также представляется существенной. Разработаны и апробированы способы получения нанокомпозитов на основе ПММА, ПП, ПВС и ПВП с использованием различных технологических маршрутов. Получены количественные данные об изменении механических характеристик материалов; разработан клеевой состав ПВП–УНТ для применения в 3D-печати; предложены перспективные области применения созданных материалов. В автореферате также отмечается наличие двух объектов ноу-хау, базы данных и шести актов о внедрении.

Достоверность представленных результатов обеспечивается комплексным использованием расчетных и экспериментальных методов, воспроизводимостью экспериментальных данных и сопоставлением результатов моделирования с экспериментом. Основные результаты работы получили достаточно широкую апробацию и представлены в 53 научных публикациях, включая работы в изданиях, рекомендованных ВАК РФ, а также индексируемых в базах Scopus и Web of Science.

Вместе с тем при ознакомлении с авторефератом возникают некоторые вопросы и замечания, которые носят преимущественно дискуссионный характер и не снижают общей положительной оценки выполненной работы.

1. При проведении DFT-расчетов для моделирования полимеров и углеродных нанотрубок в качестве одного из основных вариантов используется функционал B3LYP в сочетании с базисом 3-21G, причем одним из критериев его выбора указано минимальное машинное время. Было бы полезно более подробно обосновать, насколько использование сравнительно компактного базисного набора влияет на количественные значения энергии адсорбции и электронно-

0051, Республика Армения, г. Ереван, ул. Овсепа Эмина 123 8130, +374 12 77-57-75 www.rau.am info@rau.am

энергетические характеристики исследуемых комплексов. Представляет интерес оценка устойчивости основных выводов работы при использовании более расширенных базисов для отдельных контрольных конфигураций.

2. В работе показано, что введение УНТ приводит к существенному изменению электронно-энергетической структуры полимерных систем, а для ПММА–УНТ приводится экспериментальное значение ширины запрещенной зоны около 0,406 эВ. Представлялось бы полезным более подробно обсудить физический механизм формирования столь узкой эффективной запрещенной зоны и относительный вклад собственно изменения электронной структуры комплекса и формирования проводящей/перколяционной сети УНТ в наблюдаемые электрофизические свойства материала.

3. Полученные автором оптимальные концентрации УНТ существенно различаются для различных полимерных матриц. С практической точки зрения представляло бы интерес более детальное обсуждение универсальности предложенной методологии при переходе к другим типам полимеров и нанотрубок, а также того, какие параметры — химическая природа матрицы, степень диспергирования, геометрические характеристики УНТ или особенности межфазного взаимодействия — являются определяющими при прогнозировании оптимальной концентрации наполнителя.

Указанные замечания имеют характер научной дискуссии и, на наш взгляд, могут быть полезны для дальнейшего развития представленного направления исследований.

В целом автореферат производит положительное впечатление. Работа представляет собой завершенное комплексное исследование, в котором объединены квантово-химическое моделирование, разработка технологических подходов к получению полимерных нанокомпозитов и экспериментальное исследование их свойств. Полученные результаты обладают научной новизной, имеют теоретическое и практическое значение и получили соответствующую апробацию.

Содержание автореферата позволяет заключить, что диссертационная работа **Элбакян Лусине Самвеловны** «Полимерные нанокомпозиты на основе полиметилметакрилата, полипропилена, поливинилового спирта и поливинилпирролидона, допированные углеродными нанотрубками: теоретические расчеты, получение и свойства» соответствует заявленной специальности **2.6.6 «Нанотехнологии и наноматериалы»**, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени **доктора технических наук**.

Проф., д.ф.-м.н., академик, Эдуард Казарян, (специальность: 01.04.10 Полупроводниковая физика)
Главный научный советник ректора РАУ
Email: eduard.ghazaryan@rau.am
Phone: +374 91 416 464

Доцент, д.ф.-м.н., Давид Айрапетян, (специальность: 01.04.10 Полупроводниковая физика)
Заведующий кафедрой общей физики и квантовых наноструктур
Email: david.hayrapetyan@rau.am
Phone: +374 93 934 311

Заверяю
Учёный секретарь
Карабедова Р.С.